

两种类粒子间的聚集与完全湮没竞争过程的标度行为*

李丽 李萍萍 柯见洪[†] 夏海江 林振权

(温州大学物理与电子信息工程学院, 温州 325035)

(2014年1月14日收到; 2014年2月17日收到修改稿)

考虑一个由两种类粒子组成的系统, 同种类粒子相遇时发生不可逆的聚集反应; 不同种类的粒子相遇时, 则发生不可逆的完全湮没反应. 利用Mont-Carlo模拟各种参数条件下的粒子聚集-完全湮没竞争过程, 分析了聚集速率、湮没速率以及初始浓度分布对系统动力学行为的影响. 模拟结果表明: 1) 粒子大小分布总是满足一定的标度律; 2) 当两种粒子的聚集速率都等于湮没速率的2倍时, 粒子大小分布的标度指数与粒子初始浓度分布有关; 3) 其余情况下, 标度指数则取决于反应速率的相对大小. 此外, 当两种粒子的聚集速率都大于或等于湮没速率的两倍, 系统的所有粒子将完全湮没; 当且仅当至少一种粒子的聚集速率小于湮没速率的两倍, 聚集速率较小的那一种粒子才可能最终保存下来. 模拟结果与已报道的理论分析结果符合得较好.

关键词: 聚集-完全湮灭过程, Mont-Carlo模拟, 标度律

PACS: 82.20.-w, 68.43.Jk, 71.15.Pd

DOI: 10.7498/aps.63.118201

1 引言

不可逆的聚集与湮没现象广泛地存在于自然、社会与经济系统中, 例如大气中的气粒转化、液滴的沉积生长和聚结以及正电子在分子气体中湮没等现象^[1-4]. 自20世纪70年代以来, 学者们基于平均场理论或Monte-Carlo模拟等对各类系统的聚集和湮没反应动力学开展大量的研究, 例如聚集-湮没反应系统^[5-14]、粒子凝聚系统^[15,16]、催化驱使的聚集系统^[17]和合作/不合作集合体的竞争系统^[18]等等. 两种类(多种类)粒子的聚集-湮没反应是指, 同种类粒子间发生不可逆的聚集反应, 而不同种类的粒子间发生不可逆湮没反应. 湮没反应机理主要有三种: 部分湮没、完全湮没与单体湮没. 部分湮没机理是指不同种类的粒子一对一相互湮没, 直到至少一种粒子湮没殆尽, 可以表示为反应式 $A_i + B_j \rightarrow A_{i-j}$ ($i > j$) 或 $A_i + B_j \rightarrow B_{j-i}$ ($j > i$) 或 $A_i + B_j \rightarrow 0$ ($i = j$),

其中 A_i 代表一个包含 i 个粒子的粒子集团^[5-9]. 完全湮没机理是指, 当两个不同种类的粒子集团相遇时, 不管它们的粒子数目多少, 彼此完全湮没, 其反应式可写成 $A_i + B_j \rightarrow \text{inert}$ ^[10-13]. 举一个完全湮没的具体例子. A_i 与 B_i 都是开放的链状聚合物, 两端都具有活性, 能与同种类的聚合物结合成更长的链状体; 一旦 A_i 与 B_i 相遇, 它们的活性末端彼此结合, 形成闭合的链状聚合物, 从而失去了化学活性. 单体湮没机理是指不同种类的粒子集团相遇时彼此各损失一个粒子, 其反应式可写成 $A_i + B_j \rightarrow A_{i-1} + B_{j-1}$ ^[14].

聚集-湮没反应动力学的研究方法主要有基于平均场理论的解析计算和计算机模拟. Krapivsky基于平均场理论研究了两种类粒子系统的聚集与部分湮没的竞争过程, 发现: 1) 系统的动力学演化行为取决于反应速率比值以及两种类粒子的初始浓度; 2) 经过长时间演化后, 集团大小分布满足一定的标度律^[5]. Sokolov和Blumen采用Monte-

* 国家自然科学基金(批准号: 11175131, 10775104)资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: kejianhong@gmail.com

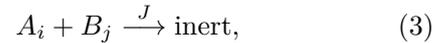
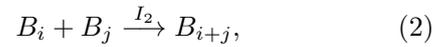
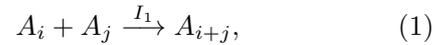
Carlo 模拟研究了规则网络上的聚集-部分湮没过程, 得到了集团浓度和粒子浓度随时间演化的规律^[7]. Zhang 和 Yang 将 Krapivsky 的工作推广到 n 种类粒子组成的系统 ($n > 2$), 解析地讨论了集团大小分布的标度特性^[8,9]. 沈伟维与朱标等采用 Monte-Carlo 模拟分别研究了小世界网络和全局耦合网络上的扩散限制的聚集-部分湮没过程, 讨论了网络结构与初始粒子浓度对动力学过程的影响, 并分析了集团大小分布的标度特性, 数值模拟结果与上述的解析结果符合得很好^[19,20]. Ben-Naim 和 Krapivsky 则关注聚集与完全湮没的竞争过程, 分别采用解析方法与数值模拟研究了聚集与湮没速率相等时系统演化动力学行为^[10]. Ke 和 Lin 采用速率方程方法详细地分析了任意参数条件下的多类粒子系统的聚集-完全湮没过程, 讨论了集团大小分布随时间的演化规律, 发现集团大小分布总是满足一定形式的标度律, 并得到了标度指数与反应速率以及初始浓度的关系^[11].

比较文献^[5]和^[11]中的研究结果可知, 虽然完全湮没机理比部分湮没机理显得简单, 但聚集-完全湮没过程具有更丰富的动力学行为. 此外, 由于计算机模拟允许的体系大小远小于热力学极限, 因此存在着有限尺寸效应. 沈伟维与朱标等的 Monte-Carlo 数值模拟结果与 Krapivsky 的解析计算结果在定性上完全一致, 但两者给出的标度指数在定量上存在一些差别. 本文将采用 Monte-Carlo 模拟研究基于全局耦合网络上的两种类粒子的聚集-完全湮没过程, 研究不同反应速率与初始粒子浓度分布情况下的集团数目、粒子数目以及集团大小分布随时间的演化规律, 以及标度指数与反应速率和初始浓度的关系.

2 全局耦合网络上的聚集-完全湮没反应动力学模型

首先构建一个节点数为 N 的全局耦合网络, 即网络中任意两个节点都有边相连. 在反应过程中, 每个节点只能被同一种粒子所占据或者没有粒子. 网络上的节点分三种状态: k 态, $-l$ 态和 0 态. 节点处于 k 态意味着该节点被 k 个 A 种类粒子所占据, 节点处于 $-l$ 态意味着该节点被 l 个 B 种类粒子占据, 而处于 0 态的节点上没有粒子. 同一个节点上的所有粒子可以认为组成了一个集团, 其大小就是该节点上的粒子数目. 为了便于讨论粒子初

始浓度分布对系统动力学的影响, 所有的模拟都给定相同的系统节点总数 10000 和初始总粒子数 2000 (即初始时刻 A 种类和 B 种类粒子数之和恒为 2000); 换言之, 在所有的模拟中, 初始粒子总浓度恒为 20%. 不妨设 B 种类粒子个数占总粒子数的比例为 m ($0 < m < 1$), m 称为初始浓度分布. 初始时刻, 部分节点被单个 A 种类或 B 种类粒子所占据. 网络上的聚集-完全湮没动力学过程的模拟如下进行. 首先, 随机地选择一个非空节点 i , 再从其近邻节点中随机选择一节点 j , 然后进行如下的扩散-反应过程: 1) 如果节点 j 为空节点, 则节点 i 上的所有粒子迁移到节点 j 上; 2) 如果 j 为非空节点, 节点 i 上的所有粒子都迁移到 j 节点, 并与原来的粒子进行如下的聚集或湮没反应^[10]:



其中 A_i 表示由 i 个 A 种类粒子组成的集团, B_j 表示由 j 个 B 种类粒子组成的集团. 反应式 (1) 和 (2) 表示含有相同种类粒子的集团发生了聚集反应, 其中 I_1 和 I_2 分别表示 A 和 B 种类集团的聚集速率; 反应式 (3) 则表示含有不同种类粒子的两集团发生了完全湮没反应, J 为湮没速率.

一般情况下, 集团在节点间的扩散速率与集团大小 s 的关系为 $D \propto s^{-q}$, 其中 q 为扩散系数. 为了与已有的聚集-完全湮没反应系统的解析结果进行比较, 本文假定集团从一个节点到另一个节点的扩散速率与集团的大小无关, 即 $q = 0$.

3 结果与分析

根据文献^[11]的解析研究结果, 粒子的聚集-完全湮没反应动力学主要取决于聚集速率 $I_1(I_2)$ 与湮没速率 J 的比值, 且临界比值为 2. 在模拟中, 我们固定湮没速率 $J = 0.25$, 通过改变聚集速率和粒子的初始浓度分布, 统计系统中集团浓度、粒子浓度和集团大小分布随时间的演化规律. 这里, 我们定义集团浓度 $C_A(t) = t$ 时刻 A 种类集团数/ N ; 粒子浓度 $G_A(t) = t$ 时刻 A 种类粒子总数/ N , 其中 N 表示网络大小. 相应地, 集团浓度 $C_B(t) = t$ 时刻 B 种类集团数/ N ; 粒子浓度 $G_B(t) = t$ 时刻 B 种类粒子总数/ N . A 种类集团大小分布 $a_s(t) = A_s(t)/N$, 其中 $A_s(t)$ 表示

t 时刻由 s 个 A 种类粒子组成的集团数(即占据着 s 个 A 种类粒子的节点数); B 种类集团大小分布 $b_s(t) = B_s(t)/N$, 其中 $B_s(t)$ 表示 t 时刻由 s 个 B 种类粒子组成的集团数. 下面分几种情况讨论聚集-湮没反应系统的动力学行为.

3.1 两种类集团的聚集速率都大于湮没速率的两倍

首先设定 $I_1 = 0.7$ 和 $I_2 = 0.8$. 图 1 所示的是初始浓度分布不同时, A 和 B 种类的集团浓度和粒子浓度随时间的分布曲线. 考虑到对称性, 模拟时初始浓度分布 m 仅选择 $m \leq 0.5$. 由图 1 可知, 系统经过一定的时间演化后, 两种类集团浓度和粒子浓度随时间的演化都满足幂律关系

$$\begin{aligned} C_A(t) &\propto t^{-\alpha_1}, & C_B(t) &\propto t^{-\alpha_2}, \\ G_A(t) &\propto t^{-\beta_1}, & G_B(t) &\propto t^{-\beta_2}. \end{aligned} \quad (4)$$

这里, 幂律指数 α 和 β 的下标 1 与 2 分别标识 A 种类与 B 种类粒子, 下文出现的各类指数有相同的规定.

由 (4) 式可知, 最终两种类粒子都将完全湮没. 这与文献 [11] 的解析结果定性一致. 我们进一步给出了上述幂律函数的指数, 并与文献 [11] 的结果进行比较, 如表 1 所示. 可见, 有限系统的聚集-完全湮没反应动力学行为与热力学极限下的平均场行为在定量上有着比较显著的差异. 集团浓度与粒子浓度随时间的衰减速率不仅与反应速率有关, 还与初始浓度分布有关.

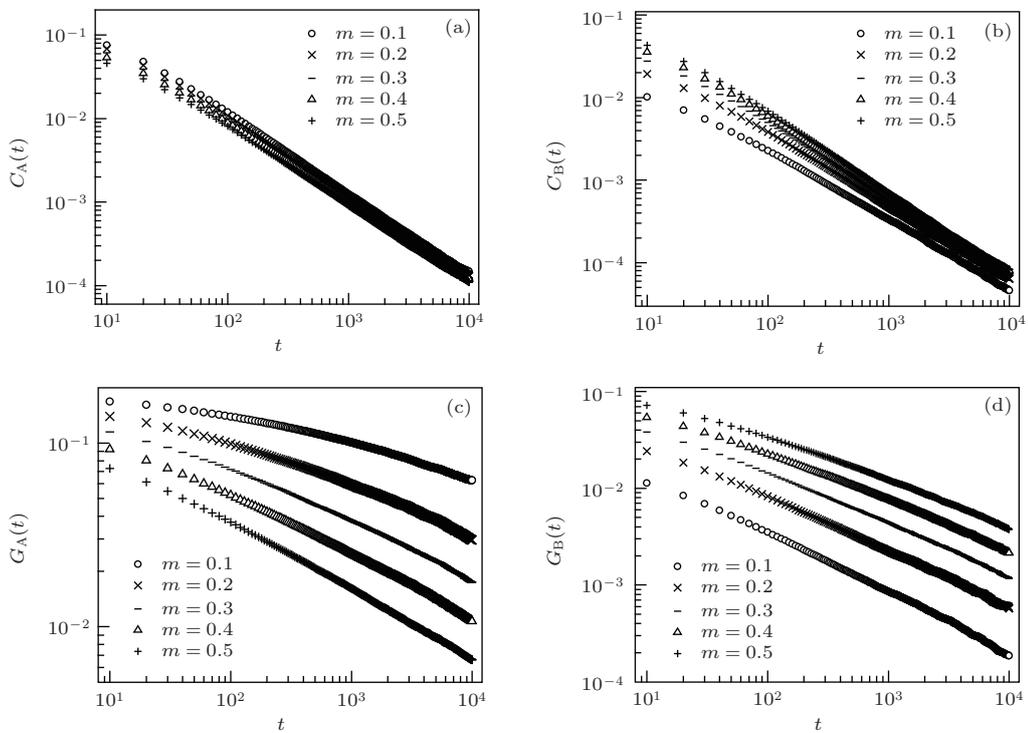


图 1 (a) A 种类集团浓度随时间的演化; (b) B 种类集团浓度随时间的演化; (c) A 种类粒子浓度随时间的演化; (d) B 种类粒子浓度随时间的演化

表 1 不同 m 值所对应的幂律指数 $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1$ 和 β_2 的值

m	α_1		β_1		α_2		β_2	
	模拟值	理论值	模拟值	理论值	模拟值	理论值	模拟值	理论值
0.1	0.956	1.0	0.225	0.323	0.850	1.0	0.647	0.484
0.2	0.953	1.0	0.309	0.323	0.883	1.0	0.582	0.484
0.3	0.947	1.0	0.341	0.323	0.922	1.0	0.550	0.484
0.4	0.934	1.0	0.374	0.323	0.940	1.0	0.524	0.484
0.5	0.927	1.0	0.385	0.323	0.953	1.0	0.483	0.484

接下来, 我们给定 $I_1 = 0.8$ 和 $m = 0.5$, 分析聚集速率 I_2 对系统动力学的影响. A 和 B 种类的集团浓度和粒子浓度随时间的分布曲线如图 2 所示. 由图可知, 两种类集团浓度和粒子浓度随时间的演化

都具有幂律形式, 幂律指数见表 2. 由表 2 可知, 随着 I_2 的增大, A 种类粒子浓度随时间的衰减速率逐渐减小, 而 B 种类粒子浓度随时间的衰减速率则逐渐增大.

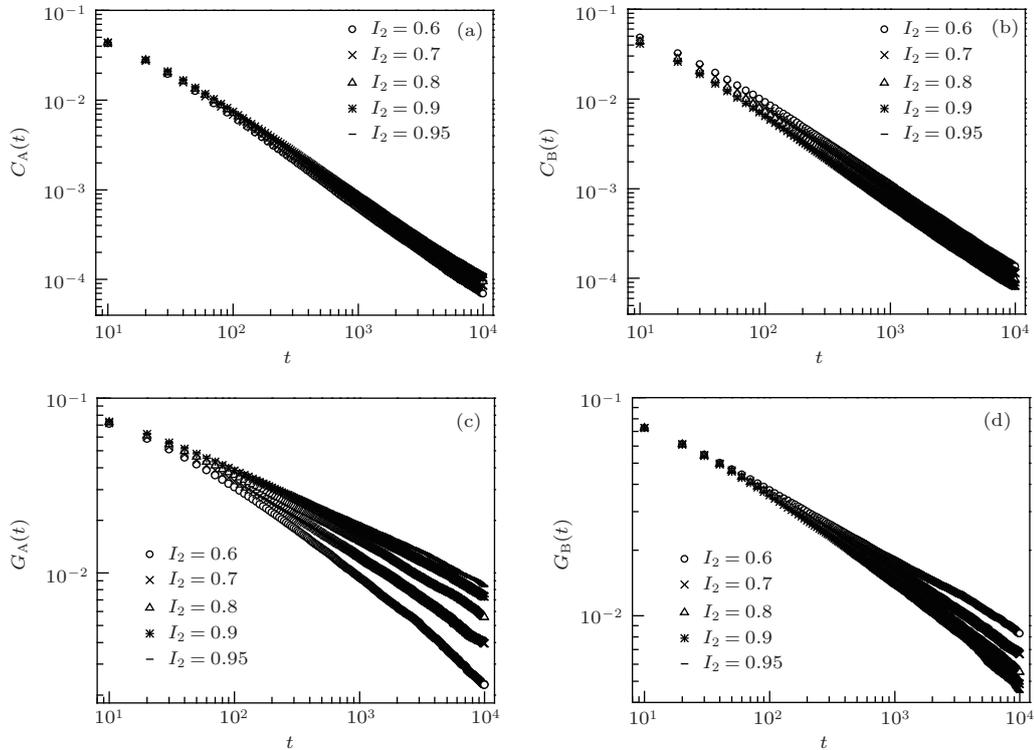


图 2 (a) A 种类集团浓度随时间的演化; (b) B 种类集团浓度随时间的演化; (c) A 种类粒子浓度随时间的演化; (d) B 种类粒子浓度随时间的演化

表 2 不同 I_2 值所对应的幂律指数 $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1$ 和 β_2 的值

I_2	α_1		β_1		α_2		β_2	
	模拟值	理论值	模拟值	理论值	模拟值	理论值	模拟值	理论值
0.6	0.977	1.0	0.583	0.652	0.915	1.0	0.325	0.217
0.7	0.948	1.0	0.479	0.484	0.921	1.0	0.375	0.323
0.8	0.926	1.0	0.408	0.385	0.924	1.0	0.413	0.385
0.9	0.920	1.0	0.365	0.319	0.939	1.0	0.439	0.426
0.95	0.914	1.0	0.339	0.294	0.941	1.0	0.458	0.441

表 3 模拟系统尺度 N 不同时幂律指数 $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1$ 和 β_2 的值

N	α_1	β_1	α_2	β_2
10^3	0.869	0.181	0.794	0.873
5×10^3	0.938	0.212	0.821	0.762
10^4	0.956	0.225	0.850	0.647
5×10^4	0.987	0.247	0.871	0.612
10^5	0.991	0.266	0.893	0.596
理论值	1.0	0.323	1.0	0.484

表 1 和表 2 的数据表明, 模拟结果与解析结果定性一致, 但两者在数值上有一定的偏差. 进一步, 给定模拟参数 $I_1 = 0.7, I_2 = 0.8, m = 0.1$ 以及初始粒子总浓度 20%, 我们得到了不同尺度系统的集团浓度与粒子浓度随时间演化的数据. 结果表明, 两种类集团浓度与粒子浓度都满足幂律形式 (4), 其幂律指数如表 3 所示. 由表 3 可知, 随着系统尺度的增大, 模拟所得的幂律指数值逐渐接近理论值. 可见, 模拟结果与解析结果之间的数值偏差在一定程度上归因于有限尺度效应. 另一方面, 模拟时

计算机产生的随机数只是伪随机数, 这个因素也有可能会导致模拟值与理论值的些许偏差.

最后我们讨论集团大小分布随时间的演化规律. 理论研究结果表明, 当 A 和 B 种类粒子的聚集速率都大于湮没速率的两倍时, A 和 B 种类集团大小 $a_s(t)$ 和 $b_s(t)$ 随时间的演化关系都具有如下的标度形式 [11]:

$$c_s(t) \propto t^{-w} \Phi[s/S(t)], \quad S(t) \propto t^z, \quad (5)$$

其中 $c_s(t)$ 为 t 时刻大小为 s 的集团浓度, $\Phi(x)$ 为标度函数,

$$S(t) = \sum_s s^2 c_s(t) / \sum_s s c_s(t)$$

为特征大小, w 和 z 为标度指数. $x \rightarrow 0$ (即 $s \ll S(t)$) 时, $\Phi(x) \approx 1$; $x \gg 1$ (即 $s \gg S(t)$) 时, $\Phi(x) \approx 0$.

不妨假设计算机模拟得到的集团大小分布的数据也满足 (5) 式. 因为

$$C_A(t) = \sum_s a_s(t), \quad C_B(t) = \sum_s b_s(t),$$

$$G_A(t) = \sum_s s a_s(t),$$

以及 $G_B(t) = \sum_s s b_s(t)$, 将 (5) 式代入可得

$$w_1 = 2\alpha_1 - \beta_1, \quad z_1 = \alpha_1 - \beta_1, \quad (6)$$

$$w_2 = 2\alpha_2 - \beta_2, \quad z_2 = \alpha_2 - \beta_2, \quad (7)$$

其中标度指数 w 和 z 的下标 1 和 2 分别标识 A 种类粒子与 B 种类粒子. 则 $a_s(t)$ 和 $b_s(t)$ 可以表示为

$$a_s(t) \propto t^{-(2\alpha_1 - \beta_1)} \Phi_1[s/S(t)],$$

$$S_1(t) \propto t^{\alpha_1 - \beta_1}, \quad (8)$$

$$b_s(t) \propto t^{-(2\alpha_2 - \beta_2)} \Phi_2[s/S(t)],$$

$$S_2(t) \propto t^{\alpha_2 - \beta_2}. \quad (9)$$

(8) 和 (9) 式可以改写为

$$a_s(t) \times t^{2\alpha_1 - \beta_1} \propto \Phi_1(s/t^{\alpha_1 - \beta_1})$$

和

$$b_s(t) \times t^{(2\alpha_2 - \beta_2)} \propto \Phi_2(s/t^{\alpha_2 - \beta_2}).$$

如果以 $a_s(t) \times t^{2\alpha_1 - \beta_1}$ 为纵坐标, 以 $s/t^{\alpha_1 - \beta_1}$ 为横坐标, 则所有的 $a_s(t)$ 数据点将塌缩在一条曲线上, 即标度函数 $\Phi_1(x)$. 同理, 以 $b_s(t) \times t^{2\alpha_2 - \beta_2}$ 为纵坐标, 以 $s/t^{\alpha_2 - \beta_2}$ 为横坐标, 则所有的 $b_s(t)$ 数据点也将塌缩成一条曲线, 即标度函数 $\Phi_2(x)$. 图 3 (a) 和 (b) 所示的是参数 $I_1 = 0.8, I_2 = 0.9$ 以及 $m = 0.5$ 时不同 s 的 $a_s(t)$ 和 $b_s(t)$ 随时间的演化曲线. 非常明显, 这些曲线是彼此分离的. 然而, 以 $a_s(t) \times t^{2\alpha_1 - \beta_1}$ 为纵轴, 以 $s/t^{\alpha_1 - \beta_1}$ 为横轴, 所有分

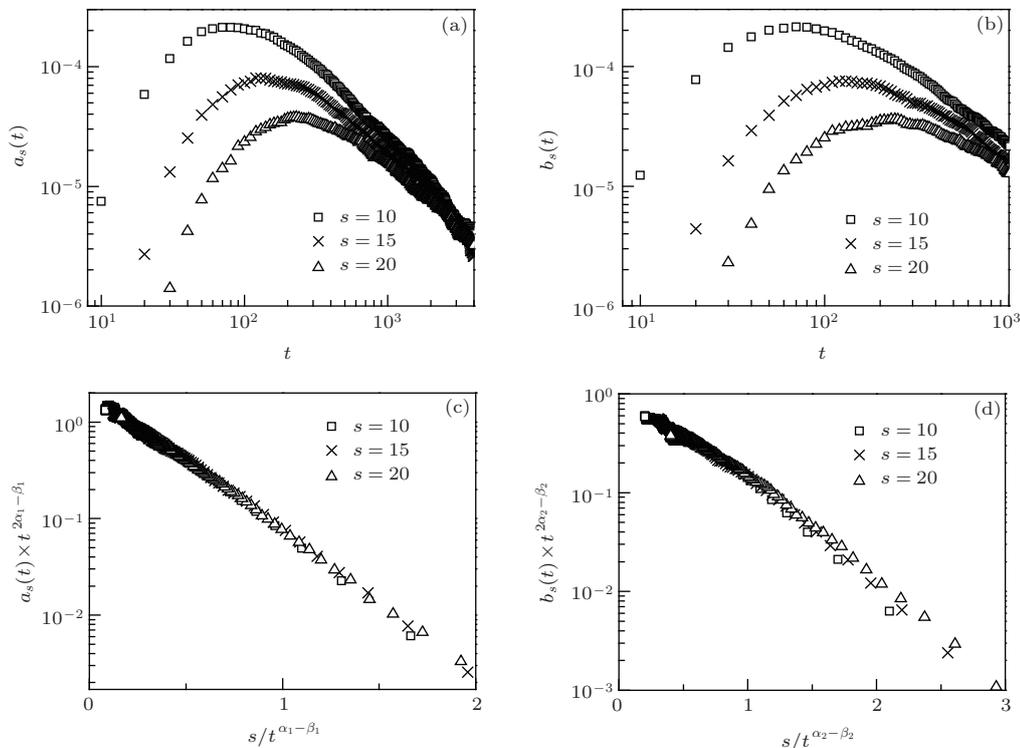


图 3 (a) A 种类集团大小分布随时间的演化; (b) B 种类集团大小分布随时间的演化; (c) A 种类集团大小分布的标度特性; (d) B 种类集团大小分布的标度特性

离的A种类集团大小分布曲线都将塌缩在一条曲线上,如图3(c)所示.同理,以 $b_s(t) \times t^{2\alpha_2 - \beta_2}$ 为纵轴,以 $s/t^{\alpha_2 - \beta_2}$ 为横轴,所有分离的B种类集团大小分布曲线也都塌缩成一条曲线,如图3(d)所示.可见,在 $I_1 > 2J$ 且 $I_2 > 2J$ 的情况下,全局耦合网络上的粒子聚集-完全湮没反应动力学具有标度特性.而且,在半对数坐标图3(c)和(d)中,标度曲线都呈现直线,可见

$$\Phi_1(x) \propto \exp(-C_1x)$$

以及

$$\Phi_2(x) \propto \exp(-C_2x),$$

其中 C_1 和 C_2 是与 x 无关的量.

3.2 两种类集团的聚集速率都等于湮没速率的两倍

考虑 $I_1 = 2J$ 且 $I_2 = 2J$ 的情况.初始浓度分布 m 不同时,两种类粒子的集团浓度和粒子浓度随时间的演化如图4所示.由图可知,在该参数条件下,集团浓度与粒子浓度随时间的演化也满足幂律形式(4),且所有的粒子最终将彼此湮没殆尽.不同 m 值时,幂率指数 $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1$ 和 β_2 的大小如表4所示.模拟结果与文献[11]的结果符合得很好.

给定参数 $I_1 = 0.5, I_2 = 0.5$ 以及 $m = 0.4$,我们得到了粒子数为10, 15和20的集团浓度随时间

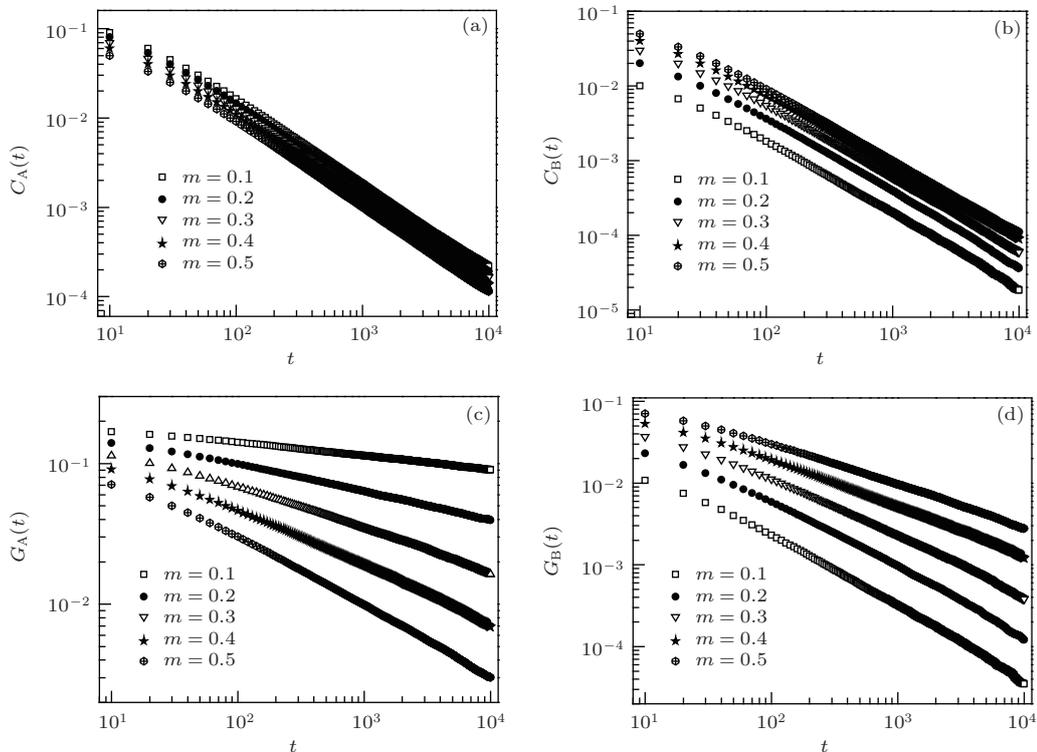


图4 (a) A种类集团浓度随时间的演化; (b) B种类集团浓度随时间的演化; (c) A种类粒子浓度随时间的演化; (d) B种类粒子浓度随时间的演化

表4 不同 m 值所对应的幂律指数 $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1$ 和 β_2 的值

m	α_1		β_1		α_2		β_2	
	模拟值	理论值	模拟值	理论值	模拟值	理论值	模拟值	理论值
0.1	0.950	1.0	0.103	0.1	1.00	1.0	0.934	0.9
0.2	0.937	1.0	0.202	0.2	1.01	1.0	0.833	0.8
0.3	0.937	1.0	0.312	0.3	0.986	1.0	0.724	0.7
0.4	0.946	1.0	0.406	0.4	0.952	1.0	0.585	0.6
0.5	0.950	1.0	0.550	0.5	0.965	1.0	0.519	0.5

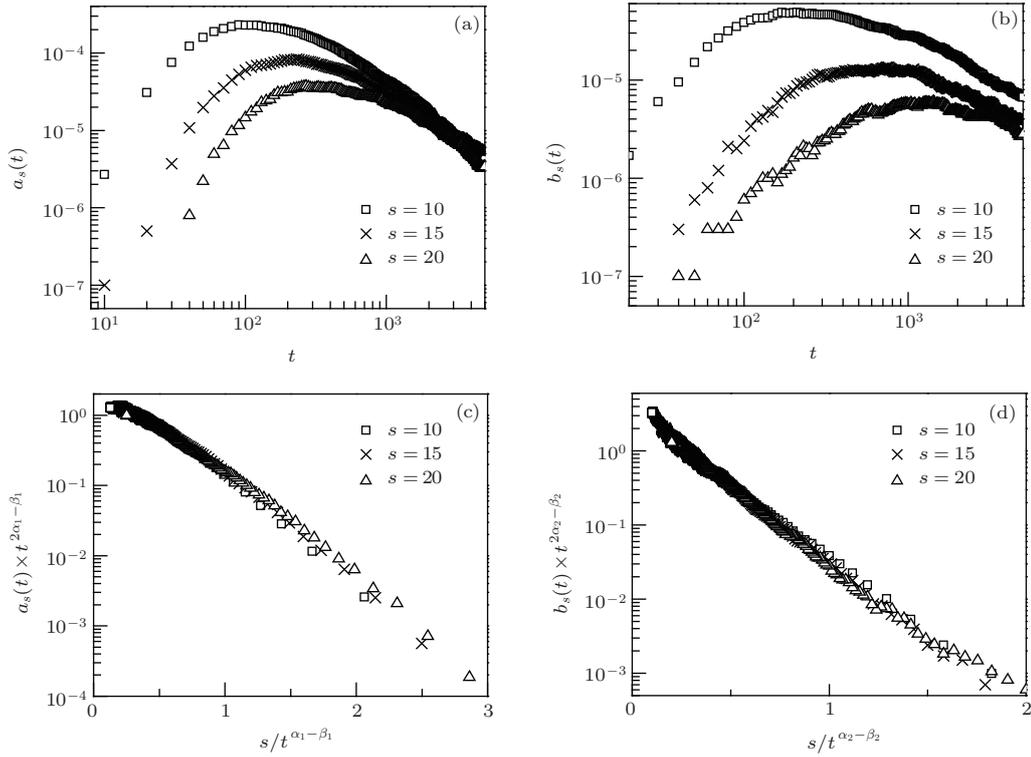


图5 (a) A 种类集团大小分布随时间的演化; (b) B 种类集团大小分布随时间的演化; (c) A 种类集团大小分布的标度特性; (d) B 种类集团大小分布的标度特性

的演化曲线, 如图 5 (a) 和 (b) 所示, 这些曲线是各自分离的. 进一步, 我们以 $a_s(t) \times t^{2\alpha_1 - \beta_1}$ 为纵坐标, 以 $s/t^{\alpha_1 - \beta_1}$ 为横坐标, 则所有的 $a_s(t)$ 数据点将塌缩在一条曲线上; 相应地, 以 $b_s(t) \times t^{2\alpha_2 - \beta_2}$ 为纵坐标, 以 $s/t^{\alpha_2 - \beta_2}$ 为横坐标, 则所有的 $b_s(t)$ 数据点也将塌缩为一条曲线, 如图 5 (c) 和 (d) 所示. 可见, 在 $I_1 = I_2 = 2J$ 的参数条件下, 集团大小分布也满足标度律 (5), 且标度函数都具有指数函数形式, 即 $\Phi_1(x) \propto \exp(-C_1x)$ 以及 $\Phi_2(x) \propto \exp(-C_2x)$.

3.3 两种类集团的聚集速率一个大于湮没速率的两倍而另一个等于湮没速率的两倍

考虑 $I_1 > 2J$ 且 $I_2 = 2J$ 的情况. 首先给定参数 $I_1 = 0.7$ 和 $I_2 = 0.5$, 分析集团浓度和粒子浓度随时间的演化规律. 根据文献 [11] 的解析

分析结果, A 种类的集团浓度随时间的演化满足 $C_A(t) \propto (t \log t)^{-\lambda_1}$, B 种类的集团浓度随时间的演化满足 $C_B(t) \propto t^{-\alpha_2}$, 且 $\lambda_1 = \alpha_2 = 1.0$; A 种类粒子浓度 $G_A(t) \propto t^{-\lambda_1} (\log t)^{\eta_1}$, B 种类粒子浓度 $G_B(t) \propto (\log t)^{-\eta_2}$, 且 $\eta_1 = \eta_2 = 2J/(I_1 - 2J)$. 非常明显, 在双对数图中, 1) $C_A(t)$ 对 $t \log t$ 的数据点呈线性分布, 如图 6 (a) 所示; 2) $C_B(t)$ 对 t 的数据点呈线性分布, 如图 6 (b) 所示; 3) $G_A(t) \times t^{\lambda_1}$ 对 $\log t$ 的数据点分布呈斜率为正的线性分布, 如图 6 (c); 4) $G_B(t)$ 对 $\log t$ 的数据点呈斜率为负的线性分布, 如图 6 (d) 所示. 可见, 模拟结果与解析结果定性一致. 我们也给出了不同 m 值所对应的幂律指数, 如表 5 所示. 比较幂律指数的模拟值与理论值表明, 有限尺度效应对系统的动力学存在一定的影响; 特别是在两种类的初始浓度差别很大的情况下, 有限尺度效应更加明显.

表 5 不同 m 值所对应的幂律指数 $\lambda_1, \alpha_2, \eta_1$ 和 η_2 的值

m	λ_1		η_1		α_2		η_2	
	模拟值	理论值	模拟值	理论值	模拟值	理论值	模拟值	理论值
0.1	0.864	1.0	4.56	2.5	0.816	1.0	5.20	2.5
0.3	0.892	1.0	2.55	2.5	0.874	1.0	3.23	2.5
0.5	0.908	1.0	1.73	2.5	0.900	1.0	2.28	2.5
0.7	0.952	1.0	1.11	2.5	0.926	1.0	1.78	2.5
0.9	0.990	1.0	0.323	2.5	0.933	1.0	0.667	2.5

然后我们给定 $I_2 = 0.5$ 以及 $m = 0.4$, 分析聚集速率 I_1 对集团浓度与粒子浓度的演化行为的影响. 如图 7 所示, A 种类的集团浓度随时间的演化满足 $C_A(t) \propto (t \log t)^{-\lambda_1}$, B 种类的集团浓度随

时间的演化满足 $C_B(t) \propto t^{-\alpha_2}$, 而粒子浓度随时间的演化关系则可表示为 $G_A(t) \propto t^{-\lambda_1} (\log t)^{\eta_1}$ 和 $G_B(t) \propto (\log t)^{-\eta_2}$, 幂律指数见表 6. 模拟值与理论值之间的偏差表明了有限尺度效应的影响.

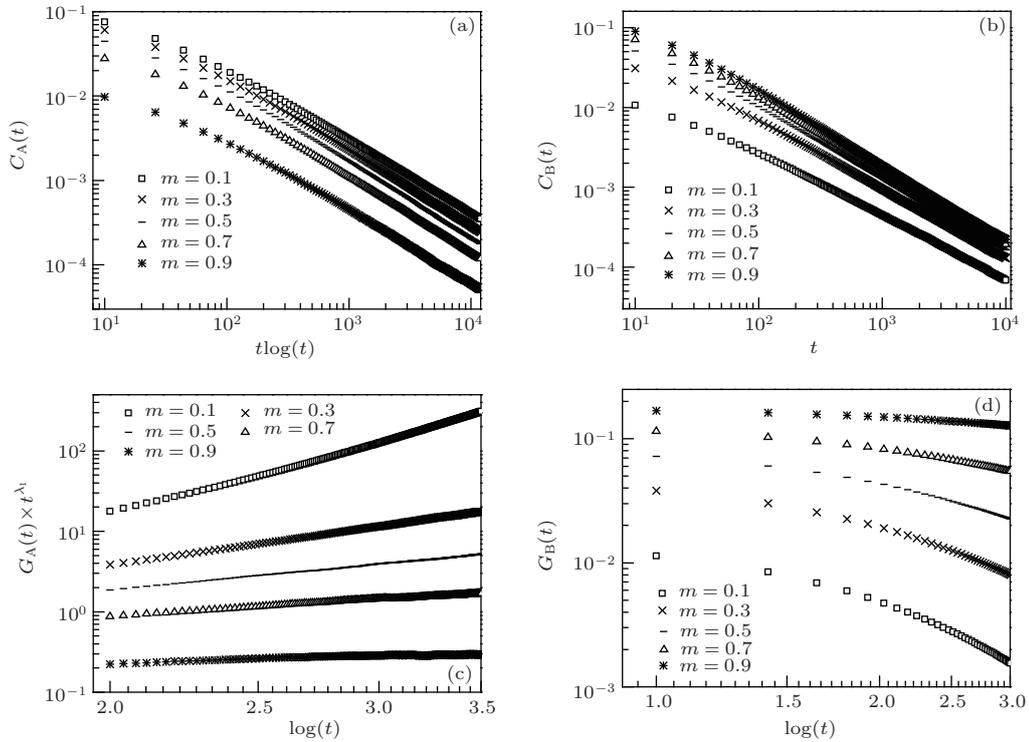


图 6 (a) A 种类集团浓度随时间的演化; (b) B 种类集团浓度随时间的演化; (c) A 种类粒子浓度随时间的演化; (d) B 种类粒子浓度随时间的演化

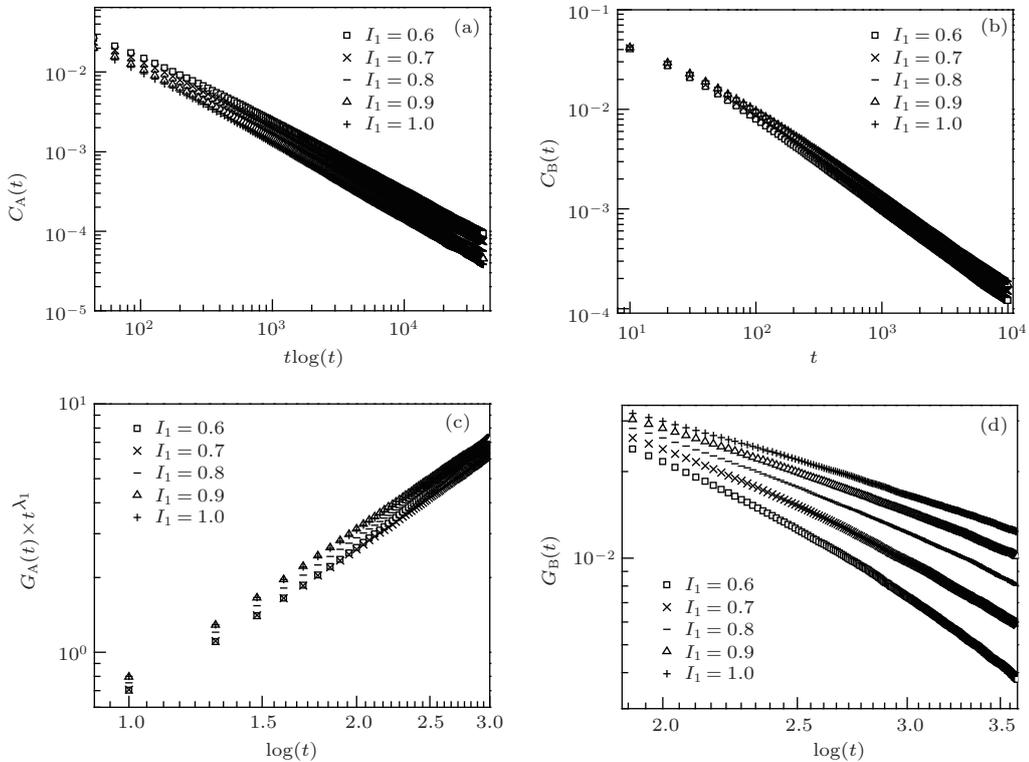


图 7 (a) A 种类集团浓度随时间的演化; (b) B 种类集团浓度随时间的演化; (c) A 种类粒子浓度随时间的演化; (d) B 种类粒子浓度随时间的演化

表6 不同 I_1 值所对应的幂律指数 $\lambda_1, \alpha_2, \eta_1$ 和 η_2 的值

I_1	λ_1		η_1		α_2		η_2	
	模拟值	理论值	模拟值	理论值	模拟值	理论值	模拟值	理论值
0.6	0.888	1.0	2.53	5.00	0.921	1.0	3.35	5.00
0.7	0.892	1.0	2.10	2.50	0.885	1.0	2.78	2.50
0.8	0.920	1.0	1.88	1.67	0.876	1.0	2.32	1.67
0.9	0.943	1.0	1.51	1.25	0.887	1.0	1.97	1.25
1.0	0.946	1.0	1.27	1.00	0.881	1.0	1.67	1.00

最后我们讨论集团大小分布 $a_s(t)$ 和 $b_s(t)$ 随时间的演化. 取 $I_1 = 0.8, I_2 = 0.5$ 以及 $m = 0.4$, 大小分别为 $s = 10, 15$ 和 20 的 $a_s(t)$ 和 $b_s(t)$ 随时间的演化如图 8 (a) 和 (b) 所示. 非常明显, 它们是分离的. 理论研究结果表明, 在这个参数条件下 A 与 B 种类的集团大小分布满足推广的标度律^[11]

$$c_s(t) \propto t^{-w} (\log t)^{-\widehat{w}} \Phi[s/S(t)],$$

$$S(t) \propto t^z (\log t)^{\widehat{z}}. \quad (10)$$

将 (10) 式代入集团浓度与粒子浓度表达式, 可得

$$w_1 = \lambda_1, \quad \widehat{w}_1 = 2\lambda_1 + \eta_1,$$

$$z_1 = 0, \quad \widehat{z}_1 = \lambda_1 + \eta_1, \quad (11)$$

$$w_2 = 2\alpha_2, \quad \widehat{w}_2 = -\eta_2,$$

$$z_2 = \alpha_2, \quad \widehat{z}_2 = -\eta_2. \quad (12)$$

于是, 以 $a_s(t) \times t^{\lambda_1} (\log t)^{2\lambda_1 + \eta_1}$ 为纵轴, 以 $s/(\log t)^{\lambda_1 + \eta_1}$ 为横轴, 所有的 A 种类集团大小分布数据都塌缩在一条曲线上; 同样, 以 $b_s(t) \times t^{2\alpha_2} (\log t)^{-\eta_2}$ 为纵轴, 以 $s/t^{\alpha_2} (\log t)^{-\eta_2}$ 为横轴, 所有的 B 种类集团大小分布数据也将塌缩成一条曲线, 且标度函数都为指数函数 $\Phi(x) = \exp(-Cx)$ (C 为与 x 无关的量), 如图 8 (c) 和 (d) 所示. 可见, 模拟结果定性符合解析结果. 在这个参数条件下, 有限系统的 A 种类与 B 种类集团大小分布也满足推广的标度律 (10).

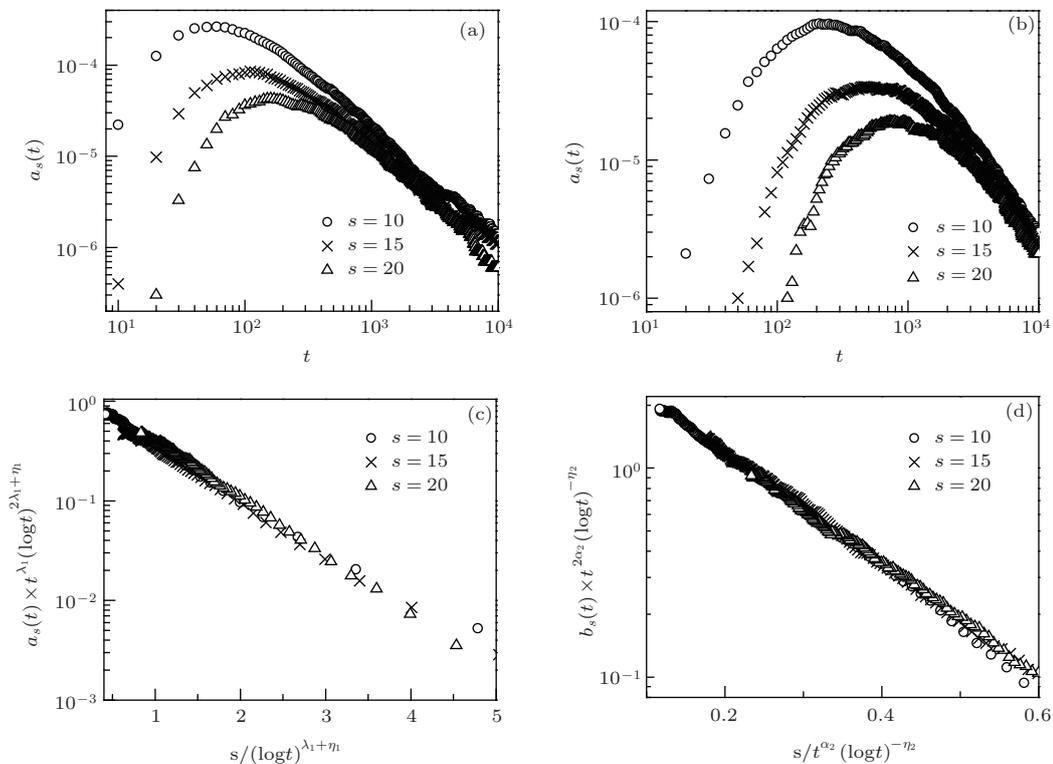


图8 (a) A 种类集团大小分布随时间的演化; (b) B 种类集团大小分布随时间的演化; (c) A 种类集团大小分布的标度特性; (d) B 种类集团大小分布的标度特性

3.4 两种类集团的聚集速率一个大于或等于湮没速率的两倍另一小于湮没速率的两倍

不妨假定 $I_1 \geq 2J$ 以及 $I_2 < 2J$. 选取模拟参数 $I_1 = 0.8$ 和 $I_2 = 0.3$, 分析 m 取值不同时两种类粒子的集团浓度和粒子浓度随时间的分布规律, 如图 9 所示. 由图可见, 只有当 m 非常小的情况下(即 A 种类粒子的初始浓度远大于 B 种类粒子), A 种类粒子才可能最终保留; 其余情况下, 所有的 A 种类粒子将被完全湮没, 而 B 种类粒子能保留. 此外, A 和 B 种类的集团浓度随时间的演化满足幂律形式 (4), 而 A 种类粒子浓度 $G_A(t)$ 与时间的关系只有在 m 大于一定值之后才满足 $G_A(t) \propto t^{-\beta_1}$, 见表 7. 理论研究结果则表明 [11], 不管初始浓度分布如何, 最终只有 B 种类粒子才能存活; A 种类的集团浓度

与粒子浓度, 以及 B 种类的集团浓度都随时间呈现幂律形式. 可见, 在这个参数条件下, 当 A 种类粒子(即聚集速率大的种类)的初始浓度较大时, 有限尺度系统的模拟结果与解析结果存在一定的偏差.

接下来, 选取模拟参数 $I_2 = 0.3$ 和 $m = 0.4$, 分析 I_1 取值不同时两种类粒子的集团浓度和粒子浓度随时间的分布规律. 由图 10 可见, A 种类的集团浓度和粒子浓度, 以及 B 种类的集团浓度随时间的演化都满足幂律形式 (4), 而 B 种类粒子最终能保留一定数量, 即 $\beta_2 = 0$. 表 8 所示的是不同 I_1 值时幂律指数 α_1, α_2 和 β_1 的值. 非常明显, 模拟所得到的幂律指数与 I_1 有关. 给定 $m = 0.4$ 和 $I_1 = 0.6$, 我们得到了集团浓度与粒子浓度的幂律指数与 I_2 的关系, 如表 9 所示; 此外, $\beta_2 = 0$. 可见, 有限尺度效应对系统的动力学行为有一定的影响.

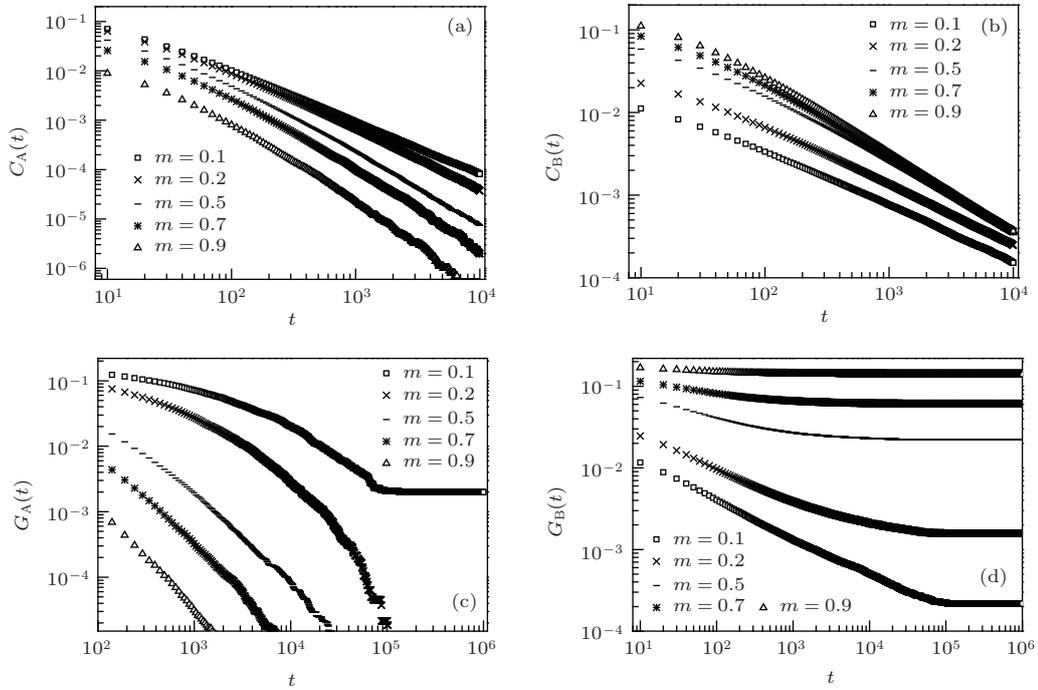


图 9 (a) A 种类集团浓度随时间的演化; (b) B 种类集团浓度随时间的演化; (c) A 种类粒子浓度随时间的演化; (d) B 种类粒子浓度随时间的演化

表 7 不同 m 值所对应的集团浓度与粒子浓度的演化规律

m	$C_A(t)$		$G_A(t)$		$C_B(t)$		$G_B(t)$	
	模拟	理论	模拟	理论	模拟	理论	模拟	理论
0.1	$\propto t^{-1.05}$	$\propto t^{-1.67}$	≈ 0.002	$\propto t^{-1.67}$	$\propto t^{-0.677}$	$\propto t^{-1.0}$	≈ 0.0002	
0.2	$\propto t^{-1.19}$	$\propto t^{-1.67}$	非幂律衰减	$\propto t^{-1.67}$	$\propto t^{-0.719}$	$\propto t^{-1.0}$	≈ 0.0016	与参数
0.5	$\propto t^{-1.43}$	$\propto t^{-1.67}$	$\propto t^{-1.41}$	$\propto t^{-1.67}$	$\propto t^{-0.852}$	$\propto t^{-1.0}$	≈ 0.022	有关的
0.7	$\propto t^{-1.58}$	$\propto t^{-1.67}$	$\propto t^{-1.58}$	$\propto t^{-1.67}$	$\propto t^{-0.894}$	$\propto t^{-1.0}$	≈ 0.062	常量
0.9	$\propto t^{-1.79}$	$\propto t^{-1.67}$	$\propto t^{-1.72}$	$\propto t^{-1.67}$	$\propto t^{-0.932}$	$\propto t^{-1.0}$	≈ 0.140	

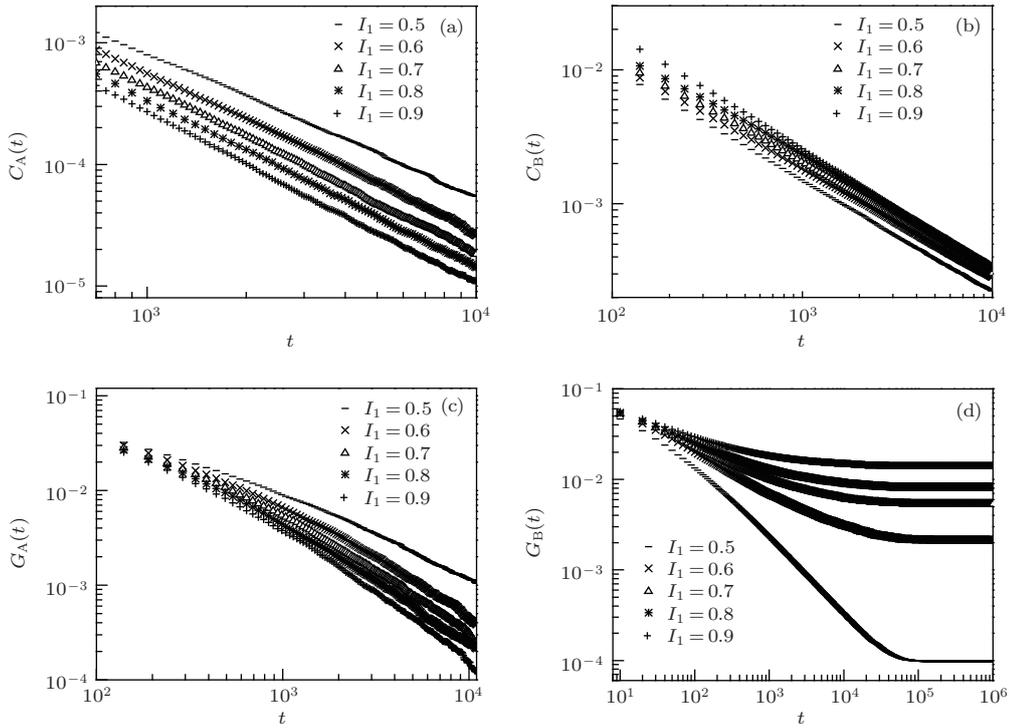


图 10 (a) A 种类集团浓度随时间的演化; (b) B 种类集团浓度随时间的演化; (c) A 种类粒子浓度随时间的演化; (d) B 种类粒子浓度随时间的演化

表 8 不同 I_1 值所对应的幂律指数 α_1 , α_2 和 β_1 的值

I_1	α_1		β_1		α_2	
	模拟值	理论值	模拟值	理论值	模拟值	理论值
0.5	1.17	1.67	0.946	1.67	0.828	1.0
0.6	1.31	1.67	1.18	1.67	0.803	1.0
0.7	1.37	1.67	1.18	1.67	0.812	1.0
0.8	1.38	1.67	1.34	1.67	0.821	1.0
0.9	1.42	1.67	1.36	1.67	0.823	1.0

表 9 不同 I_2 值所对应的幂律指数 α_1 , α_2 和 β_1 的值

I_2	α_1		β_1		α_2	
	模拟值	理论值	模拟值	理论值	模拟值	理论值
0.1	3.398	5.0	3.4184	5.0	0.7564	1.0
0.2	1.913	2.5	1.8634	2.5	0.7854	1.0
0.3	1.321	1.67	1.3143	1.67	0.8204	1.0
0.4	1.075	1.25	1.0449	1.25	0.8696	1.0

最后我们讨论集团大小分布随时间的演化规律. 文献 [11] 的解析结果表明, B 种类集团大小分布满足标度律 (5), 而 A 种类集团大小分布则满足

修正的标度律

$$a_s(t) \propto h^s t^{-w_1} \Phi_1[s/S(t)],$$

$$S(t) \propto t^{z_1}, \tag{13}$$

其中 $0 < h < 1$. 当 A 种类集团大小分布满足 (13) 式时, 可以得到集团浓度 $C_A(t) \propto t^{-w_1}$ 和粒子浓度 $G_A(t) \propto t^{-w_1}$, 即 $\alpha_1 = \beta_1 = w_1$.

选定模拟参数 $I_1 = 0.8$, $I_2 = 0.3$, 以及 $m = 0.3$, 不同大小或时刻的集团浓度分布是分离的, 如图 11 (a) 和 (b) 所示. 但是, 以 $a_s(t) \times t^{\alpha_1}$ 为纵轴, 以 s 为横轴, 所有分离的 A 种类集团大小分布曲线都将塌缩在一条曲线上, 如图 11 (c) 所示. 同理, 以 $b_s(t) \times t^{2\alpha_2}$ 为纵轴, 以 s/t^{α_2} 为横轴, 所有分离的 B 种类集团大小分布曲线都将塌缩为一条曲线, 如图 11 (d) 所示. 而且, 在半对数坐标图 11 (c) 和 (d) 中, 标度曲线都呈现直线, 可见

$$a_s(t) \times t^{\alpha_1} \propto \exp(-C_3 s)$$

以及

$$\Phi_2(x) \propto \exp(-C_2 x),$$

其中 C_3 是与 s 无关的量. 模拟结果与解析结果定性一致.

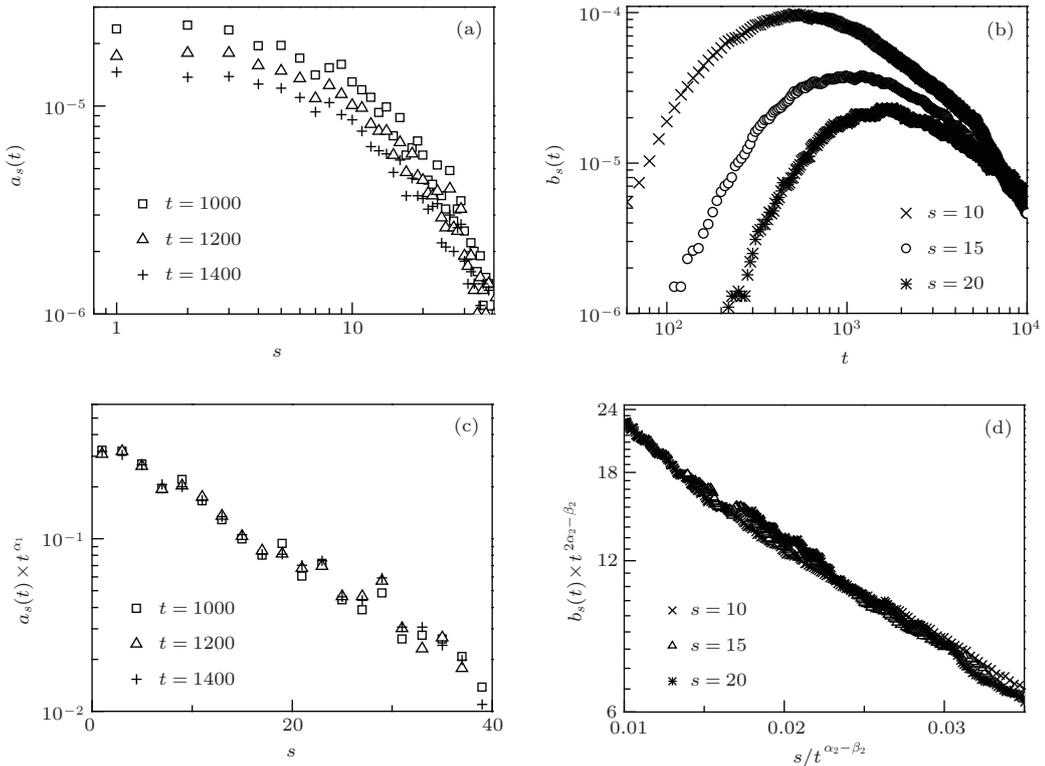


图 11 (a) A 种类集团大小随时间的演化; (b) B 种类集团大小随时间的演化; (c) A 种类集团大小分布满足修正的标度律; (d) B 种类集团大小分布满足传统的标度律

3.5 两种类集团的聚集速率都小于湮没速率的两倍

考虑 $I_1 < 2J$ 且 $I_2 < 2J$. 理论研究结果表明, 在这个参数条件下, 系统的动力学行为取决于比值

$$\gamma = (1 - m)(2J - I_1) / m(2J - I_2)^{[11]}$$

选定参数 $I_2 = 0.4$ 和 $m = 0.6$, 分析 I_1 不同值时系统的演化规律. 如图 12 所示, 随着 I_1 的增大 (即 γ 减小), A 种类粒子的最终剩余数量逐渐减小, 乃至湮没殆尽; 相反地, B 种类粒子从完全湮没转向最终保留, 且剩余数量逐渐增大. 此外, 两种类集团浓度分布总是满足幂律形式 (4), 具体数据见表 10. 可见, 当 B 种类粒子的初始浓度大于 A 种类粒子

时, 1) 如果 γ 远大于 1, 则 A 种类粒子能部分保留而 B 种类粒子被完全湮没; 2) 如果 $\gamma < 1$, 则 B 种类粒子能部分剩余而 A 种类粒子则被完全湮没; 3) 如果 γ 略大于 1, 则 A 与 B 种类粒子能够共存 (对有限尺度的系统而言). 模拟结果与理论结果定性相符, 但定量上存在比较明显的差异.

下面, 我们进一步讨论 $\gamma = 1$ 时集团浓度与粒子浓度的演化规律. 选择四组满足 $\gamma = 1$ 的参数, 模拟数据如图 13 所示. 由图可见, 两种类集团浓度与粒子浓度随时间的演化都满足幂律形式 (4), 其幂律指数见表 11; 此外, 两种类粒子最终相互湮没殆尽. 由表 11 可知, 在这个参数条件下, 模拟结果与理论结果符合得很好.

表 10 不同 I_1 值所对应的集团浓度与粒子浓度的演化规律

γ	$C_A(t)$		$G_A(t)$		$C_B(t)$		$G_B(t)$	
	模拟	理论	模拟	理论	模拟	理论	模拟	理论
2.67	$\propto t^{-0.613}$	$\propto t^{-1.0}$	≈ 0.0075	常量	$\propto t^{-3.02}$	$\propto t^{-5.0}$	$\propto t^{-3.06}$	$\propto t^{-5.0}$
2.00	$\propto t^{-0.758}$	$\propto t^{-1.0}$	≈ 0.0025	常量	$\propto t^{-1.61}$	$\propto t^{-2.5}$	$\propto t^{-1.56}$	$\propto t^{-2.5}$
1.33	$\propto t^{-0.905}$	$\propto t^{-1.0}$	≈ 0.0004	常量	$\propto t^{-0.996}$	$\propto t^{-1.67}$	≈ 0.0008	$\propto t^{-1.67}$
0.67	$\propto t^{-1.07}$	$\propto t^{-1.25}$	$\propto t^{-0.950}$	$\propto t^{-1.25}$	$\propto t^{-0.912}$	$\propto t^{-1.0}$	≈ 0.0045	常量
0.33	$\propto t^{-1.13}$	$\propto t^{-1.25}$	$\propto t^{-1.06}$	$\propto t^{-1.25}$	$\propto t^{-0.899}$	$\propto t^{-1.0}$	≈ 0.0065	常量

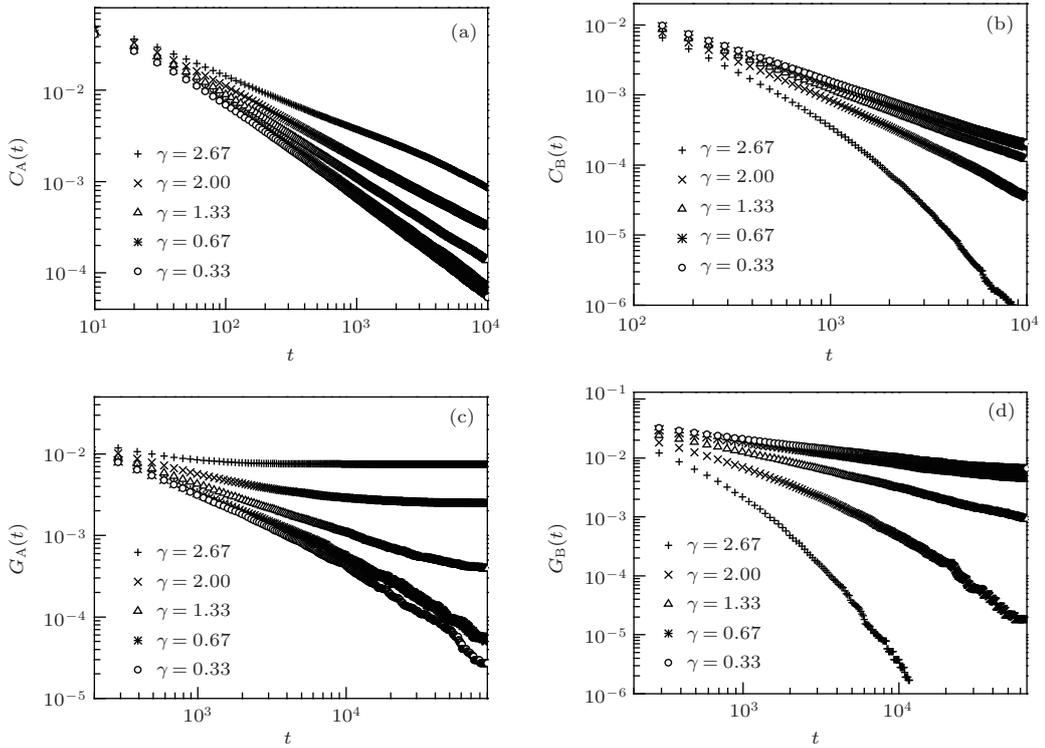


图 12 (a) A 种类集团浓度随时间的演化; (b) B 种类集团浓度随时间的演化; (c) A 种类粒子浓度随时间的演化; (d) B 种类粒子浓度随时间的演化

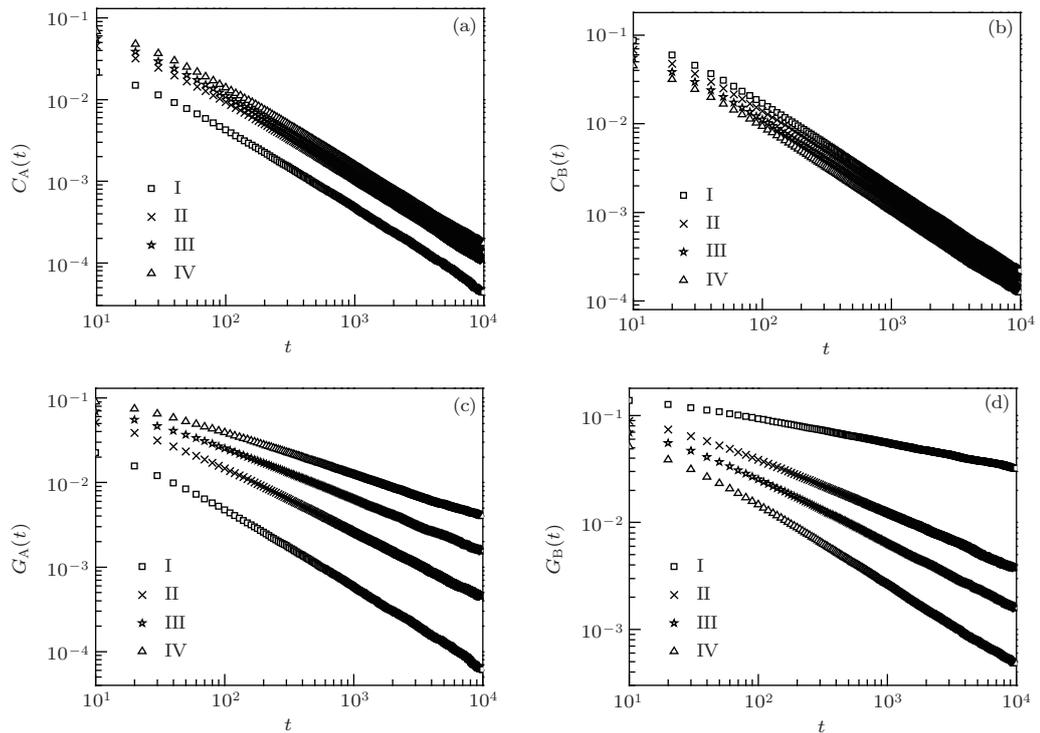


图 13 (a) A 种类集团浓度随时间的演化; (b) B 种类集团浓度随时间的演化; (c) A 种类粒子浓度随时间的演化; (d) B 种类粒子浓度随时间的演化 (其中模拟参数 I 组: $I_1 = 0.1, I_2 = 0.4$ 和 $m = 0.8$; II 组: $I_1 = 0.2, I_2 = 0.3$ 和 $m = 0.6$; III 组: $I_1 = 0.3, I_2 = 0.3$ 和 $m = 0.5$; IV 组: $I_1 = 0.3, I_2 = 0.2$ 和 $m = 0.4$)

最后我们讨论集团大小分布随时间的分布规律. 根据文献 [11] 的研究结果, 1) 当 γ 大于 1 时, A 种类集团大小分布满足标度律 (5), 而 B 种类集团大小分布则满足修正的标度律 (13); 2) 当 γ 小于 1

时, B 种类集团大小分布满足传统标度律 (5), 而 A 种类集团大小分布则满足修正的标度律 (13); 3) 当 γ 等于 1 时, A 和 B 种类集团大小分布都满足传统标度律 (5).

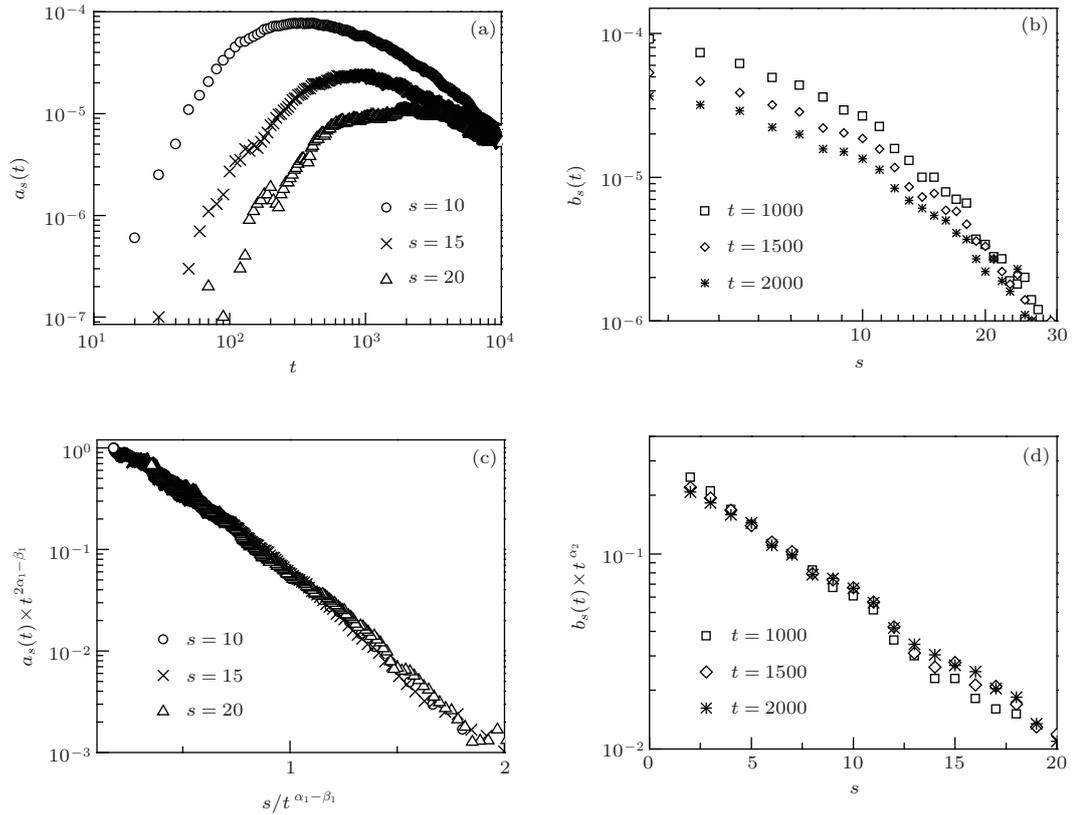


图 14 (a) A 种类集团大小分布随时间的演化; (b) B 种类集团大小分布随时间的演化; (c) A 种类集团大小分布满足传统标度律; (d) B 种类集团大小分布满足修正标度律

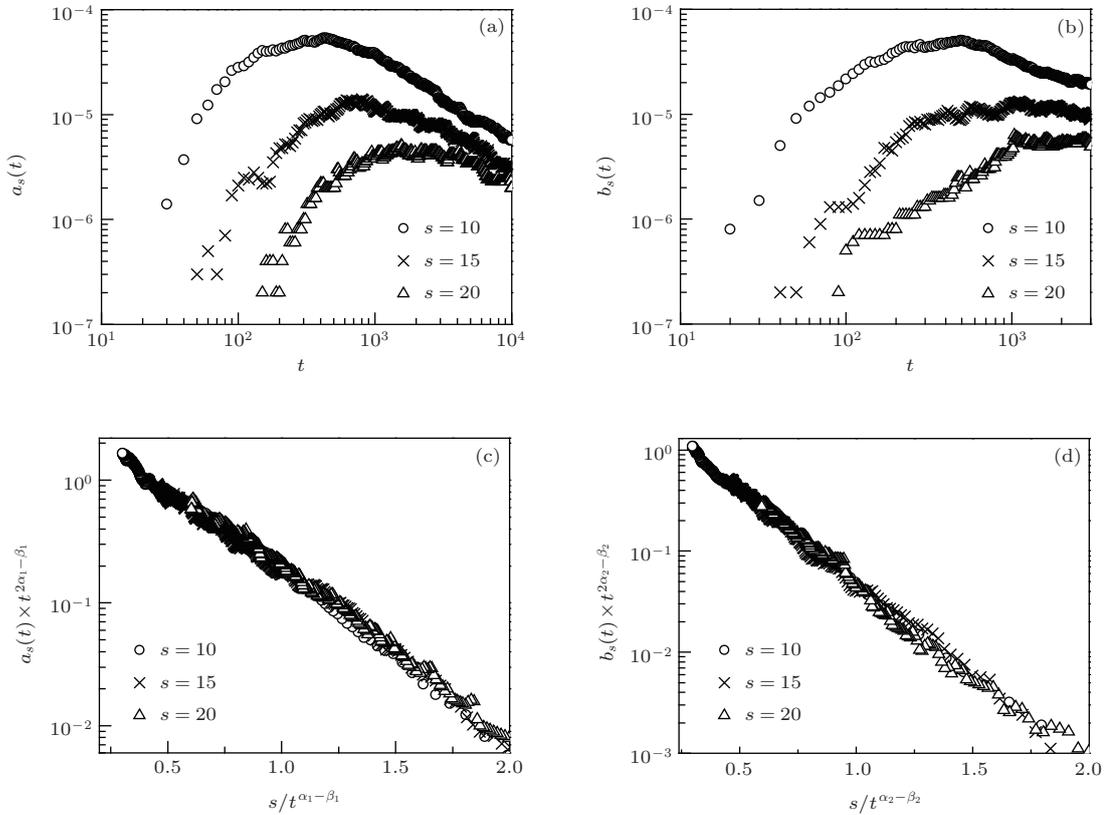


图 15 (a) A 种类集团大小分布随时间的演化; (b) B 种类集团大小分布随时间的演化; (c) A 种类集团大小分布满足传统标度律; (d) B 种类集团大小分布满足传统标度律

表 11 I_1, I_2 和 m 取不同值时幂律指数 $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1$ 和 β_2 的值

I_1	I_2	m	α_1		β_1		α_2		β_2	
			模拟值	理论值	模拟值	理论值	模拟值	理论值	模拟值	理论值
0.1	0.4	0.8	0.991	1.0	0.937	0.952	0.960	1.0	0.236	0.238
0.2	0.3	0.6	0.986	1.0	0.778	0.789	0.963	1.0	0.511	0.526
0.3	0.3	0.5	0.984	1.0	0.601	0.625	0.974	1.0	0.613	0.625
0.3	0.2	0.4	0.978	1.0	0.519	0.526	0.960	1.0	0.762	0.789

选取参数 $I_1 = 0.3, I_2 = 0.4$ 以及 $m = 0.5$ (即 $\gamma = 2.0 > 1$), 我们得到了集团大小分布的数据图, 如图 14(a) 和 (b) 所示. 然后, 以 $a_s(t) \times t^{2\alpha_1 - \beta_1}$ 为纵坐标, 以 $s/t^{\alpha_1 - \beta_1}$ 为横坐标, 可以将所有的 $a_s(t)$ 数据点将塌缩在一条曲线上; 类似地, 以 $b_s(t) \times t^{\alpha_2}$ 为纵轴, 以 s 为横轴, 所有分离的 B 种类集团大小分布曲线也将塌缩为一条曲线, 如图 14(c) 和 (d) 所示. 此外, 在半对数坐标图 14(c) 和 (d) 中, 标度曲线都呈现直线, 可见 $\Phi_1(x) \propto \exp(-C_1x)$ 以及 $b_s(t) \times t^{\alpha_2} \propto \exp(-C_4s)$, 其中 C_4 是与 s 无关的量.

给定参数 $I_1 = 0.3, I_2 = 0.3$ 以及 $m = 0.5$ (即 $\gamma = 1$) 时, 粒子数为 10, 15 和 20 的集团浓度随时间的演化曲线, 如图 15(a) 和 (b) 所示. 非常明显, 各曲线是分离的. 然而以 $a_s(t) \times t^{2\alpha_1 - \beta_1}$ 为纵坐标, 以 $s/t^{\alpha_1 - \beta_1}$ 为横坐标, 则所有的 $a_s(t)$ 数据点将塌缩在一条曲线上; 同理, 以 $b_s(t) \times t^{2\alpha_2 - \beta_2}$ 为纵坐标, 以 $s/t^{\alpha_2 - \beta_2}$ 为横坐标, 则所有的 $b_s(t)$ 数据点将塌缩在一条曲线上, 如图 15(c) 和 (d) 所示. 考虑到参数的对称性, 对 $\gamma < 1$ 的情况我们不再赘述. 综上所述, 模拟结果与解析结果定性一致.

4 结 论

本文利用 Monte-Carlo 模拟方法研究了全局耦合网络上的两种类粒子的不可逆聚集与完全湮没反应动力学行为. 系统中存在两种类的粒子: A 种类粒子和 B 种类粒子. 同种类粒子相遇, 将发生聚集反应; 不同种类的两个粒子集团相遇, 则发生完全湮没反应. 根据不同的参数条件, 详细地分析了集团浓度、粒子浓度以及集团大小分布随时间的演化规律. 研究表明, 两种粒子集团随时间的演化规律依赖于聚集速率与湮没速率的比值以及初始浓度的分布.

当两种类粒子的聚集速率都大于或都等于湮没速率的两倍时, 两种类的集团浓度与粒子浓度随

时间的演化都具有幂律形式, 集团大小分布则满足传统的标度律 (5), 且两种类粒子最终彼此完全湮没殆尽.

当一种粒子的聚集速率大于湮没速率的两倍而另一种粒子的聚集速率等于湮没速率的两倍时, 两种类粒子将最终湮没殆尽. 聚集速率较大的那个种类的集团浓度与粒子浓度与时间的关系满足修正的幂律形式, $C(t) \propto (t \log t)^{-\lambda}$ 和 $G(t) \propto t^{-\lambda} (\log t)^\eta$; 而另一种类的集团浓度随时间演化满足传统的幂律形式, 粒子浓度则可以表示为 $G(t) \propto (\log t)^{-\eta}$. 此外, 集团大小分布则满足推广的标度律 (10).

当一种粒子的聚集速率大于或等于湮没速率的两倍而另一种粒子的聚集速率小于湮没速率的两倍时, 聚集速率较小的那种粒子将部分剩余, 其集团浓度随时间以幂律形式衰减, 其集团大小分布满足传统的标度律 (5). 聚集速率较大的粒子被完全湮没, 其集团浓度与粒子浓度随时间以幂律形式衰减, 其集团大小分布则满足修正的标度律 (13).

当两种粒子的聚集速率都小于湮没速率的两倍时, 系统的动力学演化行为取决于一个参数的比值 $\gamma = (1 - m)(2J - I_1)/m(2J - I_2)$, 其中 I_1 和 I_2 分别是 A 和 B 种类粒子的聚集速率, J 是湮没速率, m 是初始时刻 B 种类粒子数占总粒子数的比例. 若 $\gamma > 1$, B 种类粒子被完全湮没, A 种类粒子则可以部分剩余; A 种类集团浓度随时间以幂律形式衰减, 其集团大小分布满足传统的标度律 (5); B 种类集团浓度与粒子浓度随时间演化都满足幂律形式, 其集团大小分布满足修正的标度律 (13). 若 $\gamma = 1$, 则该系统与 $I_1 > 2J$ 且 $I_2 > 2J$ 的系统有着相似的演化行为. 而 $\gamma < 1$ 的情况则与 $\gamma > 1$ 刚好相反.

本文还将模拟结果与基于平均场的解析结果进行了比较, 发现两者定性相符, 但定量上存在着较明显的差异. 理论结果表明, 在大部分情况下, 系统动力学演化的标度指数仅与反应速率有关. 但

由于模拟系统的有限尺度效应等原因, 模拟所得的标度指数不仅与反应速率有关, 还与粒子的初始浓度分布有关 (特别是两种类的粒子初始浓度严重不对称的情况).

综上所述, 两种类粒子系统的聚集-完全湮没反应动力学不具有普适性, 其标度指数与反应速率、初始浓度分布等有关. 该类系统普适性的缺失源自同类粒子聚集反应与异种粒子湮没反应之间的竞争. 很显然, 聚集速率大的那类粒子更容易团聚成大集团, 这些大集团在随后的一对一的湮没反应中与另一种类的小集团彼此完全湮没, 所以聚集速率大的粒子更容易率先消耗殆尽 (即使它具有更大的初始浓度). 当两种类粒子的聚集速率相等时, 湮没反应中两种类粒子的损耗相当, 初始浓度大的粒子有更大的可能剩余一部分. 另外, 如果两种类粒子的聚集速率都远大于湮没速率, 粒子聚集在反应初期占优, 从而容易团聚成大集团, 一旦两种类大集团相遇而完全湮没, 那么彼此的消耗都将是巨大的, 最终都无法存活. 诸如此类的定性结论都已在模拟中得到验证. 因此, 系统的动力学行为严重依赖于聚集速率与湮没速率之间的比例关系, 同时也与初始浓度有关.

参考文献

- [1] Frieland S K 1977 *Smoke, dust and haze: Fundamentals of aerosol behavior* (Wiley: New York)
- [2] Meakin P 1992 *Rep. Prog. Phys.* **55** 157
- [3] Vicsek T 1992 *Fractal growth phenomena* (Singapore: World Scientific)
- [4] Drake R L, Hidy G M, Brook J R (eds) 1972 *in Topic of Current Aerosol Research* (Pergamon: New York)
- [5] Krapivsky P L 1993 *Physica A* **198** 135
- [6] Krapivsky P L 1993 *Physica A* **198** 150
- [7] Sokolov I M, Blumen A 1994 *Phys. Rev. E* **50** 2335
- [8] Zhang L G, Yang Z R 1997 *Physica A* **237** 444
- [9] Zhang L G, Yang Z R 1997 *Phys. Rev. E* **55** 1442
- [10] Ben-Naim E, Krapivsky P L 1995 *Phys. Rev. E* **52** 6066
- [11] Ke J, Lin Z 2002 *Phys. Rev. E* **65** 051107
- [12] Ke J, Lin Z, Zheng Y, Chen X, Lu W 2007 *J. Phys.: Condens. Matter* **19** 065104
- [13] Ke J H, Lin Z Q, Wang X H 2003 *Chin. Phys.* **12** 443
- [14] Ke J, Lin Z 2003 *Phys. Rev. E* **67** 062101
- [15] Qian C J, Li H, Zhong R, Luo M B, Ye G X 2009 *Chin. Phys. B* **18** 1947
- [16] Ma L J, Tang M, Liang X M 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 83 (in Chinese) [马丽娟, 唐明, 梁小明 2009 物理学报 **58** 83]
- [17] Gao Y, Wang H F, Lin Z Q, Xue X Y 2011 *Chin. Phys. B* **20** 086801
- [18] Lin Z Q, Ye G X 2013 *Chin. Phys. B* **22** 058201
- [19] Shen W W, Li P P, Ke J H 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6681 (in Chinese) [沈伟维, 李萍萍, 柯见洪 2010 物理学报 **59** 6681]
- [20] Zhu B, Li P P, Ke J H, Lin Z Q 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 066802 (in Chinese) [朱标, 李萍萍, 柯见洪, 林振权 2012 物理学报 **61** 066802]

Scaling behaviours in the competing processes between aggregation and complete annihilation of two species of particles*

Li Li Li Ping-Ping Ke Jian-Hong[†] Xia Hai-Jiang Lin Zhen-Quan

(College of Physics and Electronic Information Engineering, Wenzhou University, Wenzhou 325035, China)

(Received 14 January 2014; revised manuscript received 17 February 2014)

Abstract

A two-species system is considered, in which irreversible aggregations occur between particles of the same species while irreversible complete annihilations occur between particles of different species. Such competing processes between aggregation and annihilation reactions are performed by Monte Carlo simulations under various parameter conditions, and the influences of aggregation rate, annihilation rate, and initial particle distribution on the dynamics of the system are analyzed in detail. Simulation results indicate that the particle size distributions always obey a certain scaling law. When the aggregation rates of the two kinds of particles are both twice as fast as the annihilation rate, the scaling exponents of the particle size distributions have relation with the initial particle distribution; while in the remaining cases, the scaling exponents depend crucially on the reaction rates. Moreover, when both aggregation rates are larger than or equal to the double of the annihilation rate, all particles will annihilate each other completely; while at least one of the aggregation rates is slower than the double of the annihilation rate, the species with slower aggregation rate could survive finally. Simulation results are in good agreement with the reported theoretical solutions.

Keywords: aggregation-annihilation, Monte Carlo simulation, scaling law

PACS: 82.20.-w, 68.43.Jk, 71.15.Pd

DOI: [10.7498/aps.63.118201](https://doi.org/10.7498/aps.63.118201)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11175131, 10775104).

[†] Corresponding author. E-mail: kejiahong@gmail.com